

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОКСИДА ГРАФЕНА С БИОМОЛЕКУЛАМИ ДНК И ЛЕКАРСТВЕННЫМИ ПРЕПАРАТАМИ

Наумов А.А., Пластун И.Л., Захаров А.А., Бокарев А.Н.

Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А., Россия,
410054, Саратов, ул. Политехническая, 77, offhid@mail.ru

В последние годы в современной химии набирают популярность исследования, связанные с углеродными наночастицами. Углеродные наночастицы используются в таких областях как биомедицина и фармакология. В данной работе рассматривается применения углеродных наночастиц в качестве средства доставки и удержания лекарственных и диагностических препаратов. В связи с чем проводится анализ биологической совместимости оксидированного графена с биомолекулами ДНК и возможность образования устойчивых молекулярных комплексов с лекарственными препаратами. В качестве лекарственного препарата использовался доксорубицин.

Анализ межмолекулярного взаимодействия производился на основе структур и ИК-спектров молекул и их комплексов методами теории функционала плотности (ТФП) с функционалом B3LYP и базисным набором 6-31G (d).

В результате молекулярного моделирования было обнаружено, что оксидированный графен образует молекулярные комплексы с биомолекулами ДНК так и с лекарственным препаратом доксорубицин. Анализ ИК-спектров показал, что водородные связи, образованные в большинстве молекулярных комплексов, характеризуются как связи средней силы, это связано с тем что величина частотного сдвига находится в диапазоне от 146 см⁻¹ до 217 см⁻¹, а энергия связи при этом не превышает 5 ккал/моль.

В результате расчетов обнаружено, что между оксидированным графеном, биомолекулами ДНК и доксорубицином могут происходить значительные супрамолекулярные взаимодействия, которые характеризуются наличием большого количества слабых и средних водородных связей, обеспечивающих высокую стабильность супрамолекулярных ансамблей.

Полученные результаты доказывают, что оксидированный графен имеет достаточно высокую степень биосовместимости с биомолекулами ДНК и лекарственными препаратами.